

Wechselwirkung von Wasserstoff
mit der
Re(10 $\bar{1}$ 0)- und der Pd(210)-Oberfläche

Inaugural-Dissertation
zur Erlangung der Doktorwürde
des Fachbereichs Chemie
der Freien Universität Berlins

von
Uwe Muschiol
aus Nürnberg
1998

1. Gutachter: Prof. Dr. K. Christmann
2. Gutachter: Priv. Doz. Dr. H. Over

Tag der Disputation: 19. Juni 1998

Teile dieser Arbeit wurden bereits publiziert in:

- U. Muschiol, J. Lenz, E. Schwarz und K. Christmann
Surf. Sci. **331-333** (1995) 127
- K. Christmann und U. Muschiol
Zeitschrift für Phys. Chem. **197** (1996) 155
- U. Muschiol, P. Schmidt und K. Christmann
Surf. Sci. **395** (1998) 182
- R. Döll, L. Hammer und K. Heinz
K. Bedürftig, U. Muschiol und K. Christmann
H. Bludau, A. Seitsonen und H. Over
J. Chem. Phys. (1997) eingereicht

ECOSS-Tagungsbericht:

- U. Muschiol, J. Lenz, E. Schwarz und K. Christmann
ECOSS-14 (1994) WeA-P044

BESSY-Jahresbericht:

- U. Muschiol, P. Rech, A. Vollmer, K. Christmann und F. Schneider
BESSY-Jahresbericht (1994) 302

DPG-Tagungsberichte:

- U. Muschiol, J. Lenz und K. Christmann
Verhandl. DPG (1994) O 2.2
- U. Muschiol, P. Rech, F. Schneider, A. Vollmer, E. Schwarz
und K. Christmann
Verhandl. DPG (1995) O 14.1
- U. Muschiol, K. Schmidt, E. Schwarz und K. Christmann
Verhandl. DPG (1996) O 9.1
- U. Muschiol, P. Schmidt, C. Luhmann und K. Christmann
Verhandl. DPG (1997) O 10.3

Inhaltsverzeichnis

| | | |
|----------|--|-----------|
| 1 | Einleitung | 9 |
| 2 | Grundlagen | 11 |
| 2.1 | Untersuchungsmethoden | 11 |
| 2.1.1 | Die Beugung langsamer Elektronen (LEED) | 11 |
| 2.1.2 | Thermodesorptionsspektroskopie (TDS) | 23 |
| 2.1.3 | Elektronenaustrittsarbeitsänderung ($\Delta\Phi$) | 26 |
| 2.1.4 | Augerelektronenspektroskopie (AES) | 29 |
| 2.1.5 | Winkelaufgelöste Photoelektronenspektroskopie (ARUPS) | 32 |
| 2.1.6 | Elektronenenergieverlustspektroskopie (HREELS) | 36 |
| 2.2 | Apparatives | 40 |
| 2.2.1 | Der UHV-Rezipient | 40 |
| 2.2.2 | Probenhalterung und Präparation | 41 |
| 2.3 | Grundlegendes zum Rhenium | 45 |
| 2.3.1 | Wichtige physikalisch-chemische Eigenschaften | 46 |
| 2.3.2 | Die $\text{Re}(10\bar{1}0)$ -Oberfläche | 46 |
| 2.4 | Grundlegendes zum Palladium | 48 |
| 2.4.1 | Wichtige physikalisch-chemische Eigenschaften | 48 |
| 2.4.2 | Die $\text{Pd}(210)$ -Oberfläche | 48 |
| 2.5 | Grundlagen der Wasserstoffadsorption auf Metalloberflächen | 50 |

3 Wechselwirkung von Wasserstoff mit der $\text{Re}(10\bar{1}0)$ -Oberfläche 57

| | | |
|-------|---|-----|
| 3.1 | LEED-Ergebnisse | 57 |
| 3.1.1 | Geordnete Wasserstoff-Phasen | 58 |
| 3.1.2 | Entstehung und Charakterisierung der Wasserstoff-Phasen | 59 |
| 3.1.3 | Existenzbereiche der Wasserstoff-Phasen | 61 |
| 3.1.4 | $I(V)$ -Spektren | 63 |
| 3.1.5 | Strukturanalyse | 68 |
| 3.2 | TDS-Ergebnisse | 72 |
| 3.2.1 | Dosisserien | 73 |
| 3.2.2 | Bedeckungsgradbestimmung | 74 |
| 3.2.3 | Haftkoeffizient | 75 |
| 3.3 | $\Delta\Phi$ -Ergebnisse | 76 |
| 3.3.1 | Änderung der Austrittsarbeit $\Delta\Phi$ | 76 |
| 3.3.2 | Anfangsdipolmoment μ_0 | 77 |
| 3.4 | HREELS-Ergebnisse | 78 |
| 3.4.1 | Messungen der Schwingungsverluste | 78 |
| 3.4.2 | Vergleich mit dem System Wasserstoff auf Ruthenium($10\bar{1}0$) | 86 |
| 3.5 | UPS-Ergebnisse | 89 |
| 3.5.1 | Meßgeometrie und Meßergebnisse | 90 |
| 3.5.2 | $c(2 \times 2)$ -3H-Phase | 92 |
| 3.5.3 | (1×1) -2H-Phase | 97 |
| 3.6 | Diskussion der Ergebnisse | 98 |
| 3.6.1 | Reine $\text{Re}(10\bar{1}0)$ -Oberfläche | 99 |
| 3.6.2 | Wasserstoffbedeckte $\text{Re}(10\bar{1}0)$ -Oberfläche: $\Theta = 0,9$. . . | 99 |
| 3.6.3 | $c(2 \times 2)$ -3H-Phase | 101 |
| 3.6.4 | (1×1) -2H-Phase | 104 |

| | | |
|----------|---|------------|
| 4 | Wechselwirkung von Wasserstoff mit der Pd(210)-Oberfläche | 107 |
| 4.1 | LEED-Ergebnisse | 107 |
| 4.1.1 | Beugungsbilder | 107 |
| 4.1.2 | I(V)-Spektren | 108 |
| 4.2 | TDS-Ergebnisse | 110 |
| 4.2.1 | Dosisserien ($T_{\text{ad}} \sim 120$ K) | 110 |
| 4.2.2 | H-D-Isotopenaustausch | 112 |
| 4.2.3 | Relative Bedeckung | 114 |
| 4.2.4 | Relativer Haftkoeffizient | 114 |
| 4.2.5 | Dosisserien und H-D-Isotopenaustausch ($T_{\text{ad}} \sim 50$ K) [133] | 115 |
| 4.3 | $\Delta\Phi$ -Ergebnisse | 117 |
| 4.3.1 | Adsorption bei unterschiedlichen Temperaturen oberhalb 90 K | 117 |
| 4.3.2 | Dosisserien ($T_{\text{ad}} \sim 120$ K) | 118 |
| 4.3.3 | Dosisserien ($T_{\text{ad}} \sim 50$ K) [133] | 120 |
| 4.4 | HREELS-Ergebnisse | 121 |
| 4.4.1 | Bedeckungsgradabhängige Verluste ($T_{\text{ad}} \sim 120$ K) | 121 |
| 4.4.2 | Bedeckungsgradabhängige Verluste ($T_{\text{ad}} \sim 50$ K) | 124 |
| 4.5 | Diskussion der Ergebnisse | 126 |
| 4.5.1 | Oberflächen- β -Bindungszustände | 126 |
| 4.5.2 | <i>Subsurface</i> -Wasserstoff | 135 |
| 4.5.3 | Molekularer Wasserstoff | 141 |
| 5 | Vergleich zwischen H/Re(10$\bar{1}$0) und H/Pd(210) | 145 |
| 6 | Zusammenfassung und Ausblick | 153 |

Danksagung

Besonderen Dank möchte ich Herrn Prof. Dr. K. Christmann für die Überlassung des Themas, seine vielen Anregungen und seine tatkräftige Unterstützung sowie seine stete Diskussionsbereitschaft aussprechen.

Gerade zu Beginn meiner Arbeit hatte ich auch viele konstruktive Gespräche mit Herrn Dr. E. Schwarz, dafür bedanke ich mich an dieser Stelle.

Speziell Herrn Priv. Doz. H. Over (Fritz-Haber-Institut Berlin) gilt mein Dank sowohl für sein reges, wohlwollendes Interesse an meiner Arbeit als auch für seine ständige Kooperationsbereitschaft.

Herrn Prof. Dr. Heinz (Lehrstuhl für Festkörperphysik, Universität Erlangen-Nürnberg) und seiner Arbeitsgruppe möchte ich für die erfolgreiche und erfreuliche Zusammenarbeit danken.

Meinen Diplomanden Frau Dipl.-Chem. P. Schmidt und Herrn Dipl.-Chem. K. Bedürftig danke ich für ihre im Rahmen ihrer jeweiligen Diplomarbeit geleistete Mitwirkung an meiner Dissertation.

Herrn Dipl.-Chem. D. Schlatterbeck danke ich für viele anregende fachliche Diskussionen und für das Korrekturlesen meiner Arbeit.

Frau Dipl.-Chem. A. Vollmer und Herrn Dipl.-Phys. K. Schmidt gilt mein Dank für den tiefen wissenschaftlichen Erfahrungsaustausch.

Bei allen Mitgliedern der Arbeitsgruppe möchte ich mich für die gute Zusammenarbeit, Hilfsbereitschaft und die angenehme Atmosphäre bedanken.

Frau K. Schubert gilt mein besonderer Dank für die prompte Anfertigung der vielen aufwendigen Zeichnungen.

Ich danke allen anderen, die ich aufgrund des begrenzten Platzes an dieser Stelle nicht namentlich nennen konnte, umso aufrichtiger.

Speziell Frau T. Schneider danke ich herzlich für die stete Motivation, die liebevolle Unterstützung und besonders für ihre Geduld.

Schließlich ist es mir ein außerordentlich wichtiges Anliegen, meinen Eltern für die zuteil gewordene Hilfe ausdrücklich zu danken.

Lebenslauf

Name: Uwe Muschiol

Geburtsdatum: 29.11.1965

Geburtsort: Nürnberg

Familienstand: ledig

Eltern: Theodor Muschiol
Johanna Muschiol

**Schule und
Ausbildung:** September '72 bis Juli '76
Besuch der Grundschule in Nürnberg/Katzwang

September '76 bis - Juli '85
Sigmund-Schuckert-Gymnasium in Nürnberg/Eibach
Abschluß: Abitur

Oktober '85 bis Dezember '86
Grundwehrdienst in Amberg und Regensburg

Hochschulstudium: Ab November '86 Studium der Physik
an der Friedrich-Alexander-Universität
Erlangen-Nürnberg

November '90 bis April '92
Anfertigung der Diplomarbeit am Lehrstuhl für
Festkörperphysik in Erlangen

November '92 Hauptdiplom in Physik
Abschluß: Diplom Physiker

Februar '93 Beginn der Promotion
Institut für Physikalische und Theoretische
Chemie der Freien Universität Berlin

Berlin, den 19.03.1998